

بررسی رفتار مکانیکی صفحات نانوگرافن کامل و یا با نقص ساختاری با استفاده از روش المان محدود مرزی مقیاس شده

مهرداد هنرمند¹، مهران مرادی^{2*}

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

* اصفهان، صندوق پستی 84156-83111 moradi@cc.iut.ac.ir

چکیده

در این مقاله برای اولین بار با استفاده از روش نیمه تحلیلی المان محدود مرزی مقیاس شده، صفحات نانوگرافن کامل و همچنین با نقص ساختاری شبیه‌سازی شده و رفتار مکانیکی آن مورد بررسی قرار گرفت. در این تحلیل، پیوند اتمی بین اتم‌های کربن با یک میله با سطح مقطع دایره‌ای مدل‌سازی و سپس روابط المان محدود مرزی مقیاس شده بر مبنای هندسه مدل طرح‌ریزی شد. مقایسه نتایج به دست آمده از روش المان محدود مرزی مقیاس شده با دینامیک مولکولی نشان داد که این روش تحلیل می‌تواند با دقت بالا به عنوان یک روش محیط پیوسته در تحلیل مکانیکی صفحات نانوگرافن کامل و یا با نقص ساختاری استفاده گردد. وجود نقص ساختاری به میزان قابل توجهی از استحکام و کرنش شکست صفحه نانوگرافن می‌کاهد به گونه‌ای که تنش شکست بیش از 34% و کرنش شکست بیش از 50% کاهش می‌یابد. همچنین در صورتی که به جای المان میله، صفحه نانوگرافن یک صفحه محیط پیوسته در نظر گرفته شده و به منظور ایجاد یک هندسه یکسان با مسائل دارای المان میله، محیط عاری از ماده با المان‌های دارای مدول الاستیسته صفر شبیه‌سازی گردد، نتایج دارای دقت لازم مشابه نتایج با المان میله نخواهد بود.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 19 دی 1396
پذیرش: 12 فروردین 1397
ارائه در سایت: 21 اردیبهشت 1397
کلید واژگان:
المان مرزی محدود مقیاس شده
صفحات نانوگرافن
نقص ساختاری
رفتار مکانیکی
دینامیک مولکولی

Investigation of mechanical behavior of perfect nanographene sheets and defected ones by Scaled boundary finite element method

Mehrdad Honarmand¹, Mehran Moradi^{2*}

1- PhD Student, Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan

2- Assistance Professor, Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan

*P.B.O 84156-83111, Isfahan, Iran, moradi@cc.iut.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 09 January 2018
Accepted 01 April 2018
Available Online 11 May 2018

Keywords:

Scaled boundary finite element
Nano graphene sheets
Defected
Mechanical behavior
Molecular dynamics

ABSTRACT

For the first time in this paper, by using semi-analytical scaled boundary finite element method (SBFM), a perfect nano graphene sheet or defected ones were simulated and their mechanical behavior had been investigated. In this analysis, the atomic carbon bonds were modeled by simple bar elements with circular cross-sections and then the scaled boundary finite element relations were formulated based on the geometry of the model. The obtained results from SBFM were compared to those obtained from molecular dynamic method which showed that the SBFM can be used as a continuum mechanics model with high accuracy in mechanical analysis of both perfect and defected nano graphene sheets. Existence of structural defects in nano grapheme sheets decrease the strength as well as fracture strain in a considerable manner. It can be noted that in a defected nano grapheme sheet, the fracture stress decreases more than 34% while fracture strain decreases more than 50%. In the cases that instead of using bar elements, whole area is considered as a continuum sheet and in order to obtain a similar geometry to those problems have bar elements, no material zone be modeled by zero elastic properties, the results show considerable errors.

1- مقدمه

نانوصفحات گرافن صورت گرفته است. الملتچنگو و همکاران (1997) با استفاده از دینامیک شکست صفحات نانوگرافن دسته‌سندی را بررسی کردند و مقدار ضریب شدت تنش را با استفاده از نظریه انرژی گریفیث $(4.7-6)$ مپا \sqrt{m} به دست آوردند [2]. ژانگ و همکاران (2012) با استفاده از دینامیک مولکولی شکست و رشد ترک در یک صفحه نانوگرافن را تحت بارگذاری تنش برشی و مود دوم ترک بررسی کردند. آن‌ها ثابت کردند رشد ترک به زاویه فاز بستگی داشته که

گرافن به‌عنوان یک ماده دو بعدی، با داشتن خواص شایان توجه الکتریکی، گرمایی و مکانیکی در چند دهه اخیر توجه محققان زیادی را به خود جلب کرده است. این ماده با مدول الاستیسته و استحکام به ترتیب 1TPa و 130GPa، یکی از بهترین گزینه‌ها برای تقویت نانوکامپوزیت‌ها و وسایل الکترونیکی در ابعاد میکرونانو به شمار می‌رود [1]. تلاش‌های زیادی برای تعیین ویژگی‌های مکانیکی و مدل‌سازی رفتار

در این مقاله برای اولین بار با استفاده از روش المان محدود مرزی مقیاس شده رفتار مکانیکی نانوگرافن مورد مطالعه قرار گرفته است که با توجه به سرعت و دقت بالای این روش می‌تواند در آینده، جانشین مناسبی برای المان محدود باشد.

2- روابط المان محدود مرزی مقیاس شده

در المان مرزی مقیاس شده، نقطه مقیاس O در داخل محیط و مکانی قرار می‌گیرد که از آن تمام مرز خارجی قابل مشاهده باشد. با مقیاس کردن مرز S در جهت شعاعی نسبت به نقطه مقیاس O، با استفاده از مختصات شعاعی ξ که بین صفر و یک است، تمام حوزه مورد تحلیل به بخش‌های مثلثی شکل تجزیه می‌شود که هر کدام مربوط به عناصر مرزی S^e می‌باشند (شکل 1).

$$x(\eta) = [N(\eta)]\{x\} \quad y(\eta) = [N(\eta)]\{y\} \quad (1)$$

که در رابطه (1) $\eta \in [-1, 1]$ مختصات محیطی است و (x, y) مختصات نقاط کارترین نقاط ابتدایی و انتهایی المان S^e یعنی جایی که $\xi = 1$ است، می‌باشد (رابطه 2).

$$x = \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} \quad y = \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{Bmatrix} \quad (2)$$

برای به دست آوردن نقاط داخل المان، جایی که $\xi \in [0, 1]$ از روابط (3) و (4) استفاده می‌شود:

$$x(\xi, \eta) = \xi x(\eta) = \xi [N(\eta)]\{x\} \quad (3)$$

$$y(\xi, \eta) = \xi y(\eta) = \xi [N(\eta)]\{y\} \quad (4)$$

رابطه عملگر گرادیان در مختصات کارترین و المان مرزی مقیاس شده به صورت زیر است:

$$\left\{ \frac{\delta}{\delta \xi} \right\} = [J(\xi, \eta)] \left\{ \frac{\delta}{\delta \eta} \right\} \quad (5)$$

که ماتریس ژاکوبین به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$[J(\xi, \eta)] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(\eta) & y(\eta) \\ x(\eta)_{,\eta} & y(\eta)_{,\eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \xi \end{bmatrix} [U(\eta)] \quad (6)$$

جابجایی در هر نقطه در محیط چند ضلعی از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$u(\xi, \eta) = N(\eta)u(\xi) \quad (7)$$

که در رابطه بالا $u(\xi)$ جابجایی در نقاط گوشه‌ها می‌باشد.

برای محاسبه کرنش‌ها از رابطه (8) محاسبه می‌شود:

$$\epsilon(\xi, \eta) = Lu(\xi, \eta) \quad (8)$$

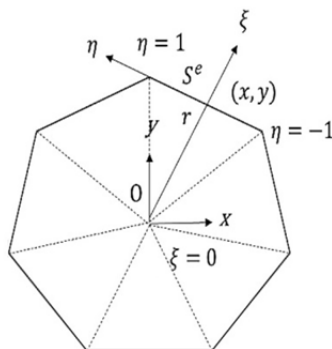


Fig. 1 Two-dimensional SBFM coordinates

شکل 1 مختصات دو بعدی در المان محدود مرزی مقیاس شده

مضربی 30 درجه نسبت به خط دهانه ترک می‌باشد [3].

خار و همکاران (2007) خواص مکانیکی صفحات نانوگرافن دسته‌سندلی با ترک‌های بزرگ را با به‌کارگیری همزمان مکانیک محیط پیوسته و دینامیک مولکولی بررسی کردند. آن‌ها دریافتند که سطح مقطع عیوب، عمود بر جهت بارگذاری، دارای تاثیر بیشتری نسبت به همان اندازه ترک و عیب در جهات دیگر است. آن‌ها همچنین ثابت کردند در صفحات معیوب با اندازه 10 انگسترم، محاسبه تنش شکست با روش استفاده شده، با روابط گریفیت بسیار همخوانی دارد [4].

زو و همکاران (2012) مقدار ضریب شدت تنش را برای دسته‌سندلی $4.21 \text{Mpa}\sqrt{\text{m}}$ و برای زیگزاگ $3.71 \text{Mpa}\sqrt{\text{m}}$ محاسبه کردند. آن‌ها همچنین نشان دادند در نانوصفات زیگزاگ رشد ترک منظم و متشابه، ولی در صفحات سندلی راحتی به‌صورت غیرمنظم می‌باشد [5].

دوپرایا و همکاران (2014) شکست صفحات نانوگرافن را با استفاده از دینامیک مولکولی و محاسبه J انتگرال در دماهای مختلف به‌دست آوردند و نشان دادند مقدار بحرانی J به طول ترک بستگی دارد [6].

مین کوی و همکاران (2014) با استفاده از دینامیک مولکولی، شکست و رشد ترک در یک صفحه نانوگرافن دسته‌سندلی تحت پیش کرنش را بررسی کردند. در این مقاله ثابت کردند برای شکست باند اتمی در کربن، طول باند باید 100 درصد کشیده شود [7].

هانکنینگ یین و همکاران (2015) معیار گریفیت را برای رشد صفحه نانوگرافن به‌کار بردند و اثبات کردند از معیار گریفیت می‌توان برای ساختار نانو گرافن در اندازه‌های کمتر از 10 نانومتر هم استفاده کرد اما مقدار تنش شکست را به میزان کمتری محاسبه می‌نماید [8].

جی لی تسای و همکاران (2009) شکست و رشد ترک به روش مکانیک محیط پیوسته و دینامیک مولکولی را بررسی کردند و ثابت کردند انرژی کرنش آزاد شده در هر دو روش با اختلاف کمی با هم برابرند و پیشنهاد دادند که انرژی کرنشی آزاد شده می‌تواند به‌عنوان یک پارامتر در مدل‌سازی شکست صفحات نانوگرافن استفاده شود [9].

روش المان محدود مرزی مقیاس شده، یک روش جدید نیمه تحلیلی است که برای حل معادلات با مشتقات جزئی کاربرد دارد. در این روش که مزایای دو روش اجزای محدود و المان مرزی را با هم ترکیب می‌کند، گسسته‌سازی فقط روی مرزها صورت می‌گیرد و بنابراین همانند روش المان مرزی ابعاد مسئله به اندازه یک بعد کاهش یافته و همانند روش اجزای محدود به هیچ‌گونه حل بنیادی نیاز ندارد.

ولف و همکاران (1995) از روابط بر پایه اصول تشابه به عنوان جایگزینی بر روش اجزای مرزی نام بردند [10]

سانگ [11]، لیندمن [12] و چیدگری [13]، با استفاده از المان محدود مرزی مقیاس شده رشد ترک در مواد مختلف را بررسی کرده و نشان دادند از این روش به‌عنوان یک روش کارآمد و با دقت بالا، می‌توان در مسائل شکست بهره برد.

از تکنیک‌هایی که تاکنون برای مطالعه شکست نانوگرافن به کار گرفته شده است، تکنیک‌های عددی پرهزینه محاسباتی، مانند دینامیک مولکولی و یا مونت کارلو را می‌توان نام برد که دارای محدودیت‌های مختلفی می‌باشند. تلاش‌های بسیاری برای پر کردن خلا بین روش‌های مولکولی و مکانیک محیط پیوسته صورت گرفته است با این حال هنوز روش جامعی در مکانیک محیط پیوسته برای مطالعه صفحات نانوگرافن پیدا نشده است.

در صورتی که جسم مورد تحلیل مانند "شکل 2" بین دو ناحیه $\xi = \xi_1$ ناحیه داخلی و $\xi = \xi_2$ ناحیه خارجی محصور باشد ثابت‌های انتگرال‌گیری و ماتریس سختی به ترتیب زیر محاسبه خواهند شد:

$$\begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_{11}\xi_1^{-\lambda} & \phi_{12}\xi_1^\lambda \\ \phi_{21}\xi_2^{-\lambda} & \phi_{22}\xi_2^\lambda \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} u(\xi_1) \\ u(\xi_2) \end{Bmatrix} \quad (27)$$

$$k = \begin{bmatrix} -\phi_{21}\xi_1^{-\lambda} & -\phi_{22}\xi_1^\lambda \\ -\phi_{21}\xi_2^{-\lambda} & -\phi_{22}\xi_2^\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{11}\xi_1^{-\lambda} & \phi_{12}\xi_1^\lambda \\ \phi_{21}\xi_2^{-\lambda} & \phi_{22}\xi_2^\lambda \end{bmatrix}^{-1} \quad (28)$$

3- مدل‌سازی صفحه نانوگرافن در المان محدود مرزی مقیاس شده

از منظر دینامیک مکانیک مولکولی، یک صفحه نانوگرافن می‌تواند به‌عنوان یک مولکول بزرگ شامل اتم‌های کربن مورد توجه قرار گیرد. هسته‌های اتمی می‌توانند به‌عنوان نقاط در ماده باشند. حرکت آن‌ها در قالب یک میدان نیرو است که با فعل و انفعالات هسته-الکترون و هسته-هسته به‌وجود می‌آید. انرژی پتانسیل کلی، با صرف‌نظر کردن از فعل و انفعالات الکترومغناطیسی، به‌صورت مجموع انرژی‌های مرتبط با کووالانس و والانس یا اندرکنش‌های پیوندی و غیرپیوندی است:

$$U = U_r + U_\theta + U_\phi + U_\omega + U_{vdw} \quad (29)$$

که U_r اثر متقابل در کشش پیوند، U_θ برای خمش زاویه‌ای پیوند، U_ϕ اثر خمش‌های خارج از پیوند و بین دو سطح، U_ω انرژی پیچش خارج از سطح و U_{vdw} انرژی فعل و انفعالات واندروالس غیرپیوندی است که در "شکل 3" نشان داده شده است.

با فرض این‌که نیروهای کووالانس بین اتم‌های کربن را می‌توان با استفاده از توابع هارمونیک جایگزین کرد، انرژی پتانسیل مربوط به پیوندهای کووالانسی بین اتم‌های کربن با معادلات زیر تعریف می‌شوند.

$$U_r = \frac{1}{2}k_r(r - r_0)^2 = \frac{1}{2}k_r(\Delta r)^2 \quad (30)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2}k_\theta(\Delta\theta)^2 \quad (31)$$

$$U_\phi = \frac{1}{2}k_\phi(\Delta\phi)^2 \quad (32)$$

که به ترتیب U_r انرژی کششی، U_θ انرژی خمشی، U_ϕ انرژی پیچشی پیوند و k_r ، k_θ و k_ϕ به ترتیب ضرایب کشش، خمش و پیچش پیوند شیمیایی می‌باشند که مقادیر آن‌ها در جدول 1 نشان داده شده است [15]. همچنین در روابط بالا r_0 ، θ_0 به فاصله بین اتمی و زاویه پیوند در حالت آزاد و مقادیر r و θ به فاصله و زاویه پیوند بعد از تغییر شکل بستگی دارند. در نتیجه پارامترهای Δr ، $\Delta\theta$ و $\Delta\phi$ به ترتیب به تغییرات در طول پیوند، زاویه پیوند و زاویه پیچشی پیوند دلالت دارند. در مدل‌سازی المان محدود پیوند کربن-کربن با یک المان میله که به‌صورت ایزوتروپیک، دارای

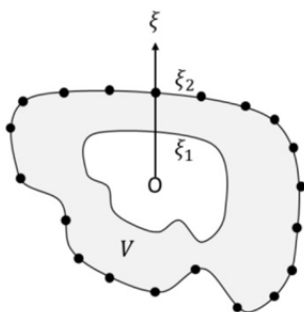


Fig. 2 bounded domain with similar interior and exterior boundaries
شکل 2 محیط محدود با مرز داخلی و خارجی مشابه

که L اپراتور ماتریس دیفرانسیل است:

$$L = b_1(\eta) \frac{\partial}{\partial \xi} + \xi^{-1} b_2(\eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (9)$$

که در معادله بالا ضرایب b_1 و b_2 عبارتند از:

$$b_1 = \frac{1}{|J(\eta)|} \begin{bmatrix} y(\eta)_{,\eta} & 0 \\ 0 & -x(\eta)_{,\eta} \\ x(\eta)_{,\eta} & y(\eta)_{,\eta} \end{bmatrix} \quad (10)$$

و

$$b_2 = \frac{1}{|J(\eta)|} \begin{bmatrix} -y(\eta) & 0 \\ 0 & x(\eta) \\ x(\eta) & -y(\eta) \end{bmatrix} \quad (11)$$

کرنش در هر نقطه از محیط به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\epsilon(\xi \cdot \eta) = B_1(\eta)u(\xi)_{,\xi} + \xi^{-1}B_2(\eta)u(\xi) \quad (12)$$

که B_1 و B_2 از رابطه زیر محاسبه می‌شوند:

$$B_1 = b_1(\eta)N(\eta) \quad (13)$$

$$B_2 = b_2(\eta)N(\eta)_{,\eta} \quad (14)$$

برای محاسبه تنش در هر نقطه می‌توان از رابطه زیر استفاده کرد:

$$\sigma(\xi \cdot \eta) = DB_1(\eta)u(\xi)_{,\xi} + \xi^{-1}DB_2(\eta)u(\xi) \quad (15)$$

با اعمال روش کار مجازی به معادله (5)، معادله المان محدود مرزی

مقیاس شده که در جهت ξ می‌تواند به‌صورت تحلیلی حل شود به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$E_0\xi^2u(\xi)_{,\xi\xi} + (E_0 - E_1 + E_1^T)\xi u(\xi)_{,\xi} - (E_1^T - E_2)u(\xi) = 0 \quad (16)$$

مقادیر E_0 ، E_1 و E_2 از روابط (17)، (18) و (19) قابل محاسبه می‌باشد:

$$E_0 = \int_{-1}^1 B_1(\eta)^T DB_1(\eta) |J(\eta)| d\eta \quad (17)$$

$$E_1 = \int_{-1}^1 B_2(\eta)^T DB_1(\eta) |J(\eta)| d\eta \quad (18)$$

$$E_2 = \int_{-1}^1 B_2(\eta)^T DB_2(\eta) |J(\eta)| d\eta \quad (19)$$

برای محاسبه نیرو در هر نقطه از معادله (20) می‌توان استفاده کرد:

$$q(\xi) = E_0\xi u(\xi)_{,\xi} + E_1^T u(\xi) \quad (20)$$

برای حل معادله المان محدود مرزی مقیاس شده (معادله 16)، با معرفی

یک تغییر متغیر، معادله، به معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه اول با دو برابر تعداد مجهولات تبدیل می‌گردد [14] که ماتریس Z ماتریس همیلتونی و ضریب معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه اول به‌صورت زیر خواهد بود:

$$Z = \begin{bmatrix} E_0^{-1}E_1^T & -E_0^{-1} \\ -E_2 + E_1E_0^{-1}E_1^T & -E_0^{-1}E_0^{-1} \end{bmatrix} \quad (21)$$

که برای محاسبه مقادیر ویژه و بردار های ویژه از رابطه (22) می‌توان استفاده کرد:

$$[z][\phi] = -[\phi][A] \quad (22)$$

و ماتریس بردار ویژه به شکل زیر می‌باشد:

$$[\phi] = \begin{bmatrix} \phi_{11} & \phi_{12} \\ \phi_{21} & \phi_{22} \end{bmatrix} \quad (23)$$

ماتریس سختی را می‌توان از رابطه (24) محاسبه نمود:

$$K = [\phi_{21}][\phi_{11}]^{-1} \quad (24)$$

بازنویسی مجدد رابطه (7) و (20) به ترتیب خواهیم داشت:

$$u(\xi) = \phi_{11}\xi^{-\lambda_i}\{c_1\} + \phi_{12}\xi^{-\lambda_i}\{c_2\} \quad (25)$$

$$q(\xi) = \phi_{21}\xi^{-\lambda_i}\{c_1\} + \phi_{22}\xi^{-\lambda_i}\{c_2\} \quad (26)$$

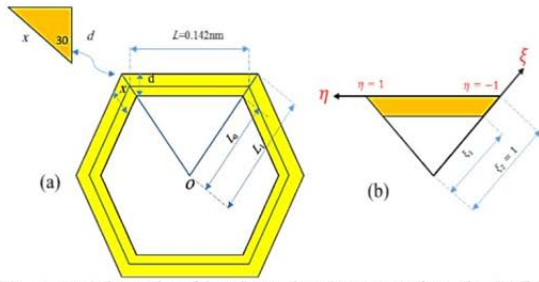


Fig. 4 (a) Schematic of bar inter-element connection, (b) Radial and tangential coordinates of C-C bond

شکل 4 (a) شماتیک اتصال المان‌های میله، (b) مختصات شعاعی و مماسی پیوند C-C

در "شکل b-4"، المان میله در مختصات محلی المان محدود مرزی مقیاس شده نمایش داده شده است.

مراحل تحلیل و برنامه‌نویسی در نرم‌افزار متلب به صورت زیر می‌باشد:

1- ورود اطلاعات مقدماتی شامل ابعاد شبکه، مدول الاستیسته، نیروها، شرایط مرزی و...

2- استفاده از روابط (17) الی (23)، جهت محاسبه E_0, E_1, E_2 ، بردار و مقادیر ویژه با فرض آن که صفحه نانوگرافن یک المان کامل باشد. (شکل 5-a)

3- محاسبه ماتریس سختی هر المان از رابطه (28) برای المان میله در محدوده $0.256 \ll \xi \ll 1$. (شکل 5(b))

4- اسمبل کردن ماتریس‌های سختی هر میله و ایجاد ماتریس سختی کل k_{total}

5- اعمال نیروهای نقطه‌ای و شرایط مرزی در رابطه $f = k_{total}u$ ، محاسبه جابجایی‌ها روی نقاط محیط 1 تا 10 برای هر میله

6- محاسبه ضرایب انتگرال‌گیری با استفاده از رابطه (27) برای هر میله

7- محاسبه تنش و کرنش برای هر میله با استفاده از روابط (25) و (26)

4-1- شبیه‌سازی صفحه نانوگرافن کامل

نمونه مورد بررسی جهت اعتبارسنجی یک صفحه نانوگرافن بدون عیب با ابعاد 40 در 40 نانگسترده می‌باشد (شکل 6).

"شکل 7" مقایسه بین تنش و کرنش شبکه نانوگرافن بین دو روش دینامیک مولکولی و المان محدود مرزی مقیاس شده را نمایش می‌دهد.

ملکوئی و همکاران (2016) [16] میزان تنش نهایی و کرنش شکست به روش دینامیک مولکولی و با برنامه‌نویسی در نرم‌افزار لمپس را به ترتیب 130.92 و 24.8% گزارش نمودند. این مقادیر با آزمایشات تجربی به ترتیب 130 ± 10 GPa و 25% [17] به دست آمده است. با استفاده از المان محدود مرزی مقیاس شده مقادیر تنش نهایی و کرنش شکست به ترتیب 127.3 GPa و 24.9% محاسبه می‌گردد. همان‌طور که در "شکل 7"

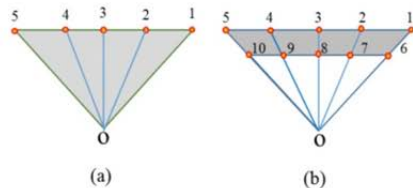


Fig. 5 (a) Element figure for calculation of constant coefficients, (b) Element figure for calculation of stiffness matrix

شکل 5 (a) شکل المان جهت محاسبه ضرایب ثابت، (b) شکل المان جهت محاسبه ماتریس سختی

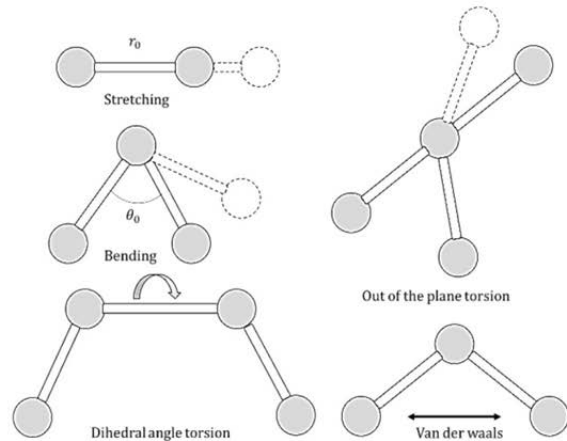


Fig. 3 Interatomic interactions in molecular mechanics

شکل 3 نیروهای بین اتمی در دینامیک مولکولی

جدول 1 ضرایب دینامیک مولکولی

Table 1 The molecular mechanics constants

| ضریب | مقدار |
|------------|---|
| K_θ | $8.76 \times 10^{-10} \text{ N nm/rad}^2$ |
| K_ϕ | $78 \times 10^{-10} \text{ N nm/rad}^2$ |
| K_T | $6.52 \times 10^{-7} \text{ N/nm}$ |

طول L ، سطح مقطع A و ممان اینرسی I جایگزین می‌شود. انرژی کرنشی المان تیر با این مشخصات تحت بار محوری خالص N ، تحت لنگر خمشی M و تحت ممان پیچشی خالص T به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$U_N = \int_0^L \frac{N^2}{2EA} dL = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2 \quad (33)$$

$$U_M = \int_0^L \frac{M^2}{2EI} dL = \frac{EI}{2L} (2\alpha)^2 \quad (34)$$

$$U_T = \int_0^L \frac{T^2}{2GJ} dL = \frac{GJ}{2L} (2\beta)^2 \quad (35)$$

اگر در المان محدود مرزی مقیاس شده سطح مقطع را یک دایره به شعاع r در نظر گرفته می‌شود در این صورت شعاع دایره 0.0733 نانومتر و مدول الاستیسته 5.487 تراپاسکال خواهد بود.

4-2- شبیه‌سازی صفحه نانوگرافن در المان محدود مرزی مقیاس شده

برای شبیه‌سازی صفحات نانوگرافن همان‌طور که قبلاً اشاره شد، پیوند اتمی به یک میله با سطح مقطع معادل تبدیل گردید. در این مقاله تمام محاسبات توسط نرم‌افزار متلب صورت گرفته است.

برای انجام محاسبات در المان محدود مرزی مقیاس شده، همان‌طور که در "شکل 4" دیده می‌شود هر میله مانند یک محیط پیوسته می‌باشد که در مختصات شعاعی (ξ) المان مرزی مقیاس شده بین دو مقدار $1 \ll \xi \ll \xi_1$ محدود می‌شود. مقدار ξ_1 با توجه به محاسبات قبلی و مطابق "شکل 4" به شرح زیر محاسبه می‌گردد. در این محاسبات L طول اولیه پیوند برابر با 0.142nm و d قطر میله 0.146nm می‌باشد:

$$\cos(30) = \frac{d}{x} \quad x = \frac{d}{\cos(30)} = 0.168 \text{ nm} \quad (36)$$

$$L_0 = L - \frac{x}{2} = 0.142 - 0.084 = 0.058 \text{ nm} \quad (37)$$

$$L_1 = L + \frac{x}{2} = 0.142 + 0.084 = 0.226 \text{ nm} \quad (38)$$

$$\xi_1 = \frac{L_0}{L_1} = \frac{0.058}{0.226} = 0.256 \quad (39)$$

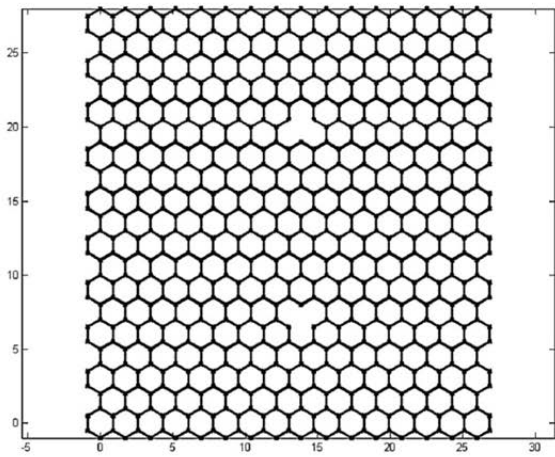


Fig. 8 Two vacancies in the line perpendicular to the line load direction

شکل 8 دو جای خالی عمود بر خط اعمال نیرو

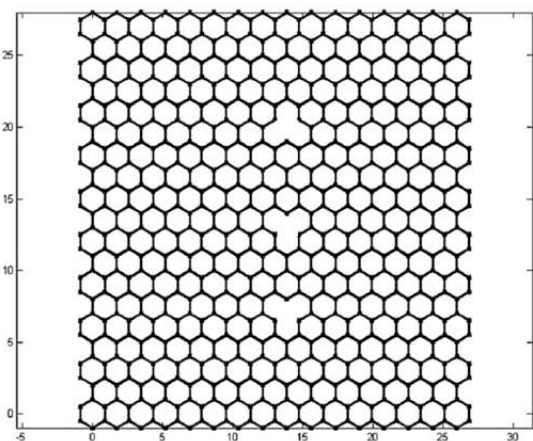


Fig. 9 Three vacancies in the line perpendicular to the line load direction

شکل 9 سه جای خالی عمود بر خط اعمال نیرو

همان‌طور که در "شکل 10 و 11" مشاهده می‌شود نتایج تقریباً تطابق مناسبی دارند. با مشاهده و مقایسه نتایج یک صفحه کامل با صفحات دارای نقص ساختاری مشاهده می‌شود که به میزان قابل توجهی از مقادیر تنش شکست کاسته می‌شود به طوری که تنش شکست از میزان 128Gpa به 77Gpa کاهش پیدا کرده است. لذا می‌توان نتیجه گرفت یک نقص جای خالی می‌تواند استحکام یک صفحه نانو گرافن را تا حدود 40% به شدت کاهش دهد. از نکات قابل توجه دیگر آن است که رابطه تنش-کرنش در این صفحات تا حدود زیادی به صورت تقریباً خطی باقی می‌ماند. کرنش شکست نسبت به صفحات بدون نقص ساختاری به کمتر از نصف کاهش پیدا می‌کند.

3-4- شبیه‌سازی صفحه نانوگرافن با المان محدود مرزی مقیاس شده با المان محیط پیوسته

در صورتی که در شبیه‌سازی صفحات نانوگرافن با المان محدود مرزی مقیاس شده، به جای استفاده از المان میله در شبیه‌سازی، محیط را پیوسته در نظر گرفته و به منظور ایجاد هندسه یکسان با مسائل دارای المان میله، محدوده عاری از ماده با ضریب الاستیک صفر در نظر گرفته شود، نتایج دارای خطای قابل ملاحظه‌ای خواهد بود.

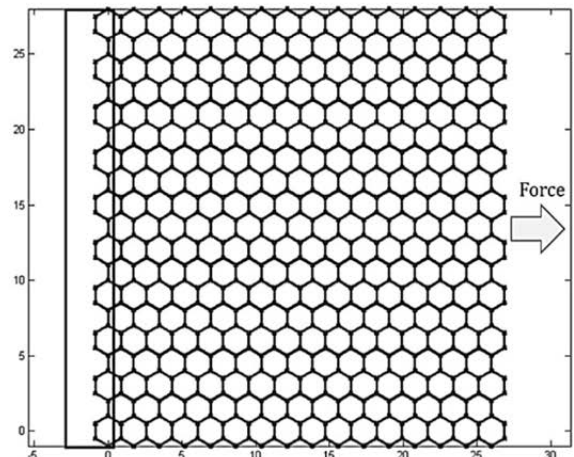


Fig. 6 The uniaxial tensile load on a perfect Nano graphene sheet

شکل 6 نیروی کششی یک طرفه بر یک صفحه کامل نانو گرافن

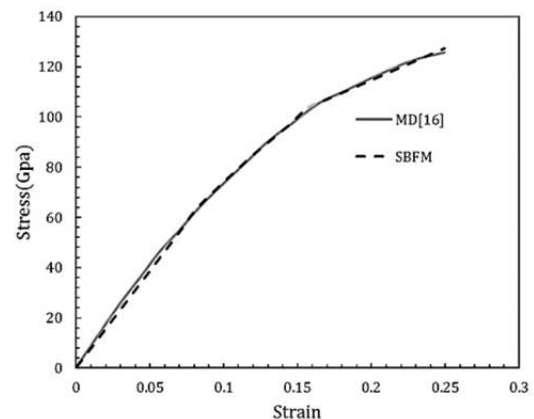


Fig. 7 Comparing stress-strain curves of the perfect sample obtained by SBFM and MD

شکل 7 مقایسه بین نمودار تنش کرنش یک صفحه نانو گرافن کامل در المان محدود مرزی مقیاس شده و دینامیک مولکولی

مشاهده می‌شود میزان خطا بین مقادیر تنش نهایی به دست آمده از دینامیک مولکولی و المان محدود مرزی مقیاس شده 2.8% می‌باشد. در روش المان مرزی مقیاس شده با توجه به معادل‌سازی رابطه تنش-کرنش با یک منحنی سه خطی، نمودارهای به دست آمده به صورت قطعه به قطعه خط مستقیم بوده که با افزایش میزان تنش وارد شده و در نتیجه پاره شدن پیوند بین اتمی، ماتریس سختی کاهش پیدا نموده و لذا شیب خطوط نمودار تنش و کرنش نیز کاهش می‌یابد. اما با وجود این ساده‌سازی، دقت نتایج به دست آمده بسیار قابل توجه می‌باشد. با افزایش تنش از 100Gpa که معادل کرنش 15% می‌باشد شیب نمودار نسبتاً افت قابل ملاحظه‌ای پیدا می‌کند و تا حدودی به حالت مجانبی میل می‌کند.

2-4- شبیه‌سازی صفحه نانو گرافن با نقص ساختاری

در "شکل‌های 8 و 9" یک صفحه نانوگرافن با نقص ساختاری شبکه جای خالی دیده می‌شود. در "شکل 8" نقص شبکه شامل عدم وجود 2 اتم کربن و در نتیجه عدم وجود 6 پیوند اتمی، و در "شکل 9"، نقص شبکه شامل سه اتم کربن که باعث عدم وجود 9 پیوند اتمی است، دیده می‌شوند. در هر دو حالت نقص جای خالی عمود بر خط اعمال نیرو است.

5- نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از المان محدود مرزی مقیاس شده رفتار یک صفحه نانوگرافن کامل و دارای نقص جای خالی شبیه سازی شد. پیوند اتمی بین اتم های کربن-کربن به صورت یک میله با سطح مقطع دایره ای شکل، که هر میله مانند یک سطح محدود بین دو مختصات در نظر گرفته شد، سپس روابط المان محدود مرزی مقیاس شده پیاده گردید و جهت اعتبارسنجی صفحه نانوگرافنی با ابعاد 40 در 40 انگستریم کامل بدون نقص، با دو نقص جای خالی و با سه نقص جای خالی، با فرض تنش از یک طرف مورد بررسی قرار گرفت.

مقایسه نتایج حاصل از شبیه سازی نشان داد، روش المان محدود مرزی مقیاس شده با المان میله می تواند با خطای کمتر از 3% جایگزین مناسبی برای دینامیک مولکولی باشد.

در بررسی دو نمونه با نقص جابجایی نشان داده شد با افزایش تعداد نقص جای خالی از دو اتم به سه اتم، میزان تنش و کرنش شکست به طور قابل ملاحظه ای کاهش پیدا می کند.

نتایج حاصل از شبیه سازی نشان داد که روش معقول برای بررسی رفتار مکانیکی صفحات نانوگرافن، استفاده از المان میله می باشد و در شرایط یکسان دقت نتایج به دست آمده در مقایسه با المان های پیوسته قابل ملاحظه می باشد.

6- فهرست علائم

- b_1, b_2 ضرایب اپراتور ماتریس دیفرانسیل
- B_1, B_2 ضرایب کرنش
- $\{c_1\}$ ضرایب انتگرال گیری
- $\{c_2\}$
- D ماتریس الاستیسیته
- E_0, E_1, E_2 ضرایب المان محدود مرزی
- J ماتریس ژاکوبین
- K ماتریس سختی
- L اپراتور ماتریس دیفرانسیل
- N تابع شکل
- q نیروی نقطه ای
- $u(\xi, \eta)$ جابجایی
- U_r انرژی کشش پیوند
- U_φ انرژی خمش های خارج از پیوند
- U_ω انرژی پیچش خارج از سطح
- U_{vdw} انرژی فعل و انفعالات واندروالس غیر پیوندی
- علائم یونانی**
- η مختصات در جهت محور محیطی در المان مرزی
- ξ مختصات در جهت شعاعی در المان مرزی
- $\sigma(\xi, \eta)$ تنش در مختصات المان مرزی مقیاس شده
- $[\phi]$ ماتریس بردارهای ویژه
- $[A]$ ماتریس مقادیر ویژه

7- مراجع

[1] F. Meng, C. Chen, J. Song, Lattice trapping and crack decohesion in graphene, *Carbon*, Vol. 116, pp. 33-39, 2017.

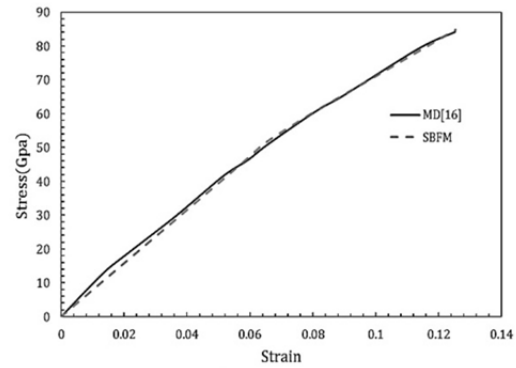


Fig. 10 Comparing stress-strain curves of a sample with two vacancies obtained by SBFM and MD

شکل 10 مقایسه بین نمودار تنش کرنش یک صفحه نانو گرافن یا دو نقص جای خالی در المان محدود مرزی مقیاس شده و دینامیک مولکولی

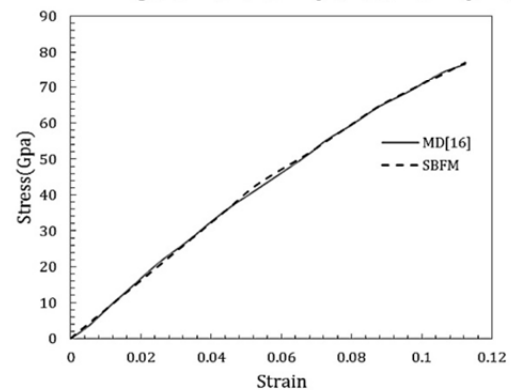


Fig. 11 Comparing stress-strain curves of a sample with three vacancies obtained by SBFM and MD

شکل 11 مقایسه بین نمودار تنش کرنش یک صفحه نانو گرافن یا سه نقص جای خالی در المان محدود مرزی مقیاس شده و دینامیک مولکولی

در "شکل 12"، نمودار تنش-کرنش برای نمونه با سه جای خالی در هر سه روش مقایسه شده است. همان طور که مشاهده می شود در شبیه سازی با روش المان محدود مرزی مقیاس شده با محیط پیوسته، میزان تنش شکست و کرنش شکست به ترتیب 79.8GPa و 11% خواهند بود که در مقایسه با روش المان مرزی مقیاس شده با المان میله و دینامیک مولکولی دارای خطای 6% می باشد.

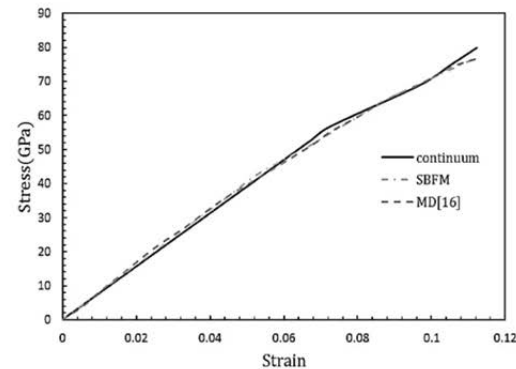


Fig. 12 Comparing stress-strain curves of a sample with three vacancies obtained by SBFM with bar element, Continuum and MD

شکل 12 مقایسه بین نمودار تنش کرنش یک صفحه نانوگرافن یا سه نقص جای خالی در المان محدود مرزی مقیاس شده با المان میله، محیط پیوسته و دینامیک مولکولی

- [10] J. P. Wolf, C. Song, Dynamic-stiffness matrix in time domain of unbounded medium by infinitesimal finite element cell method, *Earthquake Engineering & Structural Dynamics*, Vol. 23, No. 11, pp. 1181-1198, 1994.
- [11] C. Song, Evaluation of power-logarithmic singularities, T-stresses and higher order terms of in-plane singular stress fields at cracks and multi-material corners, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 72, No. 10, pp. 1498-1530, 2005.
- [12] J. Lindemann, W. Becker, Analysis of the free-edge effect in composite laminates by the boundary finite element method, *Mechanics of Composite Materials*, Vol. 36, No. 3, pp. 207-214, 2000.
- [13] S. R. Chidgzy, A. J. Deeks, Determination of coefficients of crack tip asymptotic fields using the scaled boundary finite element method, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 72, No. 13, pp. 2019-2036, 2005.
- [14] C. Song, A matrix function solution for the scaled boundary finite-element equation in statics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, No. 23, pp. 2325-2356, 2004.
- [15] K. Tserpes, P. Papanikos, Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes, *Composites Part B: Engineering*, Vol. 36, No. 5, pp. 468-477, 2005.
- [16] M. Malakouti, A. Montazeri, Nanomechanics analysis of perfect and defected graphene sheets via a novel atomic-scale finite element method, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 94, pp. 1-12, 2016.
- [17] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science*, Vol. 321, No. 5887, pp. 385-388, 2008.
- [2] A. Omeltchenko, J. Yu, R. K. Kalia, P. Vashishta, Crack front propagation and fracture in a graphite sheet: a molecular-dynamics study on parallel computers, *Physical Review Letters*, Vol. 78, No. 11, pp. 2148, 1997.
- [3] B. Zhang, L. Mei, H. Xiao, Nanofracture in graphene under complex mechanical stresses, *Applied Physics Letters*, Vol. 101, No. 12, pp. 121915, 2012.
- [4] R. Khare, S. L. Mielke, J. T. Paci, S. Zhang, R. Ballarini, G. C. Schatz, T. Belytschko, Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets, *Physical Review B*, Vol. 75, No. 7, pp. 075412, 2007.
- [5] Z. Xu, Graphene nano-ribbons under tension, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, Vol. 6, No. 3, pp. 625-628, 2009.
- [6] M. Dewapriya, R. Rajapakse, A. Phani, Atomistic and continuum modelling of temperature-dependent fracture of graphene, *International Journal of Fracture*, Vol. 187, No. 2, pp. 199-212, 2014.
- [7] M. Q. Le, R. C. Batra, Crack propagation in pre-strained single layer graphene sheets, *Computational Materials Science*, Vol. 84, pp. 238-243, 2014.
- [8] H. Yin, H. J. Qi, F. Fan, T. Zhu, B. Wang, Y. Wei, Griffith criterion for brittle fracture in graphene, *Nano letters*, Vol. 15, No. 3, pp. 1918-1924, 2015.
- [9] J. L. Tsai, S. H. Tzeng, Y. J. Tzou, Characterizing the fracture parameters of a graphene sheet using atomistic simulation and continuum mechanics, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47, No. 3, pp. 503-509, 2010.